ЖЭТФ, 2020, том 158, вып. 5 (11), стр. 853–857

НОВЫЕ ВРЕМЕННЫЕ АСИМПТОТИКИ ВЕРОЯТНОСТИ ВЫЖИВАНИЯ ПРИ ЗАХВАТЕ ЧАСТИЦ НА ЛОВУШКИ В СРЕДАХ С АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИЕЙ

В. Е. Архинчеев[*]

Laboratory of Applied Physics, Advanced Institute of Materials Science, Ton Duc Thang University 700000, Ho Chi Minh City, Vietnam

Faculty of Applied Sciences, Ton Duc Thang University 700000, Ho Chi Minh City, Vietnam

Поступила в редакцию 10 апреля 2020 г.,
после переработки 10 апреля 2020 г.
Принята к публикации 12 апреля 2020 г.

Исследована проблема захвата частиц, диффундирующих как обычным способом, так и аномальным субдиффузионным способом, на поглощающие ловушки. Показано, что в такой задаче возникают два характерных диффузионных времени, соответственно возникают три временных интервала. Установлены новые временные — степенные и дробно-экспоненциальные асимптотики вероятности выживания частиц на этих интервалах, которые обусловлены характером диффузии частиц в сильно анизотропных средах.

DOI: 10.31857/S0044451020110097

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема диффузии частиц в средах с поглощающими ловушками изучалась во многих работах [1–3]. Исходно она формулировалась для описания переходных токов как задача Continuous Time Random Walk (CTRW) [4, 5], когда захват сводился просто к временной задержке на ловушках. Для случая полностью поглощающих ловушек в приближении эффективной среды, когда предполагается равномерное распределение поглощающих ловушек по пространству при малых временах, было показано, что вероятность выживания частиц, диффундирующих обычным образом, равна [3]

$$W(t,c) = W_0 \exp(-Dtc^2). \tag{1}$$

Здесь D — коэффициент диффузии, c — концентрация ловушек в одномерном случае. Соответственно, возникает характерное время диффузии на расстоянии порядка среднего расстоянии между ловушками $t_c = 1/Dc^2$. Асимптотика малых времен соответствует $t \ll t_c$. В другом предельном случае больших времен, $t \gg t_c$, вероятность выживания частиц определяется появлением редких флуктуационных областей, свободных от ловушек:

$$W(t,c) = W_0 \exp\left(-\frac{\sqrt{\pi}(Dtc^2)^{d/(d+2)}}{3}\right). \tag{2}$$

Необходимо подчеркнуть, что оба результата (1) и (2) относятся к случаю обычных случайных блужданий, при которых среднеквадратичное смещение линейно по времени:

$$\langle X^2(t)\rangle = 2Dt. \tag{3}$$

Однако в настоящее время известны много стохастических процессов, носящих аномальный субдиффузионный характер, т. е. со степенной зависимостью среднеквадратичного смещения от времени [6, 7]:

$$\langle X^2(t)\rangle \propto t^{2/d_w}. \tag{4}$$

Здесь d_w — критический индекс аномальной диффузии. Соответственно, возникает вопрос об изменении временных зависимостей (1) и (2) в случае аномальных диффузионных процессов, который и будет исследован в настоящей статье. В разд. 2 введено обобщенное диффузионное уравнение дробного порядка. В разд. 3 исследована вероятность выживания частиц в средах с поглощающими ловушками

[*] E-mail: valeriy.arkhincheev@tdtu.edu.vn

на малых временах. В разд. 4 исследованы асимптотики на промежуточных и больших временах, установлены новые временные зависимости. В разд. 5 обсуждены полученные результаты. В Приложении изложено краткое введение в проблему захвата на ловушки.

2. ФУНКЦИЯ ГРИНА УРАВНЕНИЯ ДИФФУЗИИ ДРОБНОГО ПОРЯДКА, ОПИСЫВАЮЩЕГО АНОМАЛЬНЫЕ СУБДИФФУЗИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ

Как известно, для описания аномальных субдиффузионных процессов [7] предложен аппарат дробного дифференцирования [8,9]. В частности, в модели гребешковой структуры [10] было выведено обобщенное уравнение дробного порядка [11–13]:

$$\left(\frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} + D_{eff}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) g(t,x) = 0. \tag{5}$$

Здесь $D_{eff} = D_1/2\sqrt{D_2}$ — эффективный коэффициент диффузии вдоль оси гребешковой структуры, D_1 — коэффициент диффузии вдоль оси x в исходной модели, D_2 — коэффициент диффузии вдоль оси y в модели (подробнее см. [11–13]). Функция Грина этого уравнения в (k,t)-представлении имеет вид функции Миттаг–Лефлера [8]:

$$G(t,k,0) = \int\limits_0^\infty \tau \exp\left(-D_1 k^2 \tau - \frac{D_2\tau^2}{4t}\right) \times \frac{\sqrt{D_2^3}}{\sqrt{\pi\ D_1 t^3}}\,\partial\tau. \tag{6}$$

Легко проверить, что среднеквадратичное смещение вдоль оси гребешковой структуры зависит от времени субдиффузионным способом:

$$\langle X^2(t)\rangle \propto D_1\sqrt{\frac{t}{D_2}}. \tag{7}$$

Выражение для среднеквадратичного смещения необходимо нормировать, поскольку число частиц на оси не сохраняется:

$$G(t,k,0) = \frac{2D_2}{\sqrt{\pi D_1 t}}. \tag{8}$$

3. ВЕРОЯТНОСТЬ ВЫЖИВАНИЯ ЧАСТИЦ В СРЕДАХ С ПОГЛОЩАЮЩИМИ ЛОВУШКАМИ ПРИ АНОМАЛЬНЫХ СУБДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССАХ

В настоящем разделе построено решение для уравнения дробного порядка с начальными и граничными условиями, указанными в Приложении, см. формулу (22). Будем искать решение в виде разложения по собственным функциям и с использованием полученного выше выражения (6):

$$G(t,k,0) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\phi_n \iint\limits_0^\infty \tau \exp\left(-D_1 k_n^2 \tau - \frac{D_2\tau^2}{4t}\right) \times \frac{\sqrt{D_2^3}}{\sqrt{\pi\ D_1 t^3}}\,\partial\tau. \tag{9}$$

Здесь собственные функции равны

$$\phi_n = \frac{\sin(k_n(x_i))}{k_n l_i}, \tag{10}$$

где $k_n = 2\pi n/l_i$, $l_i = |x_{i+1} - x_i|$ и a_n — коэффициенты разложения по собственным функциям. Соответственно, искомая функция вероятности W диффундирующих частиц равна

$$W(t) = \sum_i W_i = \sum_i \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} W(x,t)\,\partial x. \tag{11}$$

Рассмотрим приближение эффективной среды с равномерным распределением ловушек по пространству, т. е. в качестве функции распределения возьмем распределение в виде

$$f = \delta(l - c^{-1}). \tag{12}$$

Тогда выражение для вероятности выживания частиц примет вид

$$G(t,k,0) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\phi_n \iint\limits_0^\infty \tau \exp\left(-D_1 k^2 \tau - \frac{D_2\tau^2}{4t}\right) \times f(l-c^{-1}) \frac{\sqrt{D_2^3}}{\sqrt{\pi\ D_1 t^3}}\,d\tau = \int\limits_0^\infty \tau \exp\left(-\frac{D_1\tau}{c^2} - \frac{D_2\tau^2}{4t}\right) \times \frac{\sqrt{D_2^3}}{\sqrt{\pi\ D_1 t^3}}\,d\tau. \tag{13}$$

После соответствующих вычислений получим [14]

$$G(t,k,0) = \frac{D_2}{\sqrt{\pi D_1 t}}\left(1 + \sqrt{\frac{t}{t_c}}\ \mathrm{erf}\left(\frac{t}{t_c}\right)\right). \tag{14}$$

Здесь $\mathrm{erf}(x)$ — известная функция ошибок [15]. Соответственно, на малых временах $t \ll t_c$ получим степенное убывание:

$$G(t,k,0) = \frac{2D_2}{\sqrt{\pi D_1 t}}. \tag{15}$$

Таким образом, убывание частиц со временем соответствует выражению (8) и отражает несохранение числа частиц при аномальных блужданиях в модели гребешковой структуры. Подчеркнем, что на малых временах захват на ловушки фактически не влияет на временную асимптотику.

4. ВЕРОЯТНОСТЬ ВЫЖИВАНИЯ ДИФФУНДИРУЮЩИХ ЧАСТИЦ НА ПРОМЕЖУТОЧНЫХ И НА БОЛЬШИХ ВРЕМЕНАХ

Продолжим исследовать временную асимптотику вероятности выживания частиц в средах с аномальной диффузией. Отметим, что в этих задачах возникает два характерных времени: помимо диффузионного времени возникает еще одно время, связанное с аномальной диффузией, $t_c^1 = D_2/D_1^2c^4$ — см. также формулу (7). Соответственно возникает интервал малых времен $t \ll t_c$, изученный выше, далее интервал промежуточных времен $t_c \ll t \ll t_c^1$ и, наконец, интервал асимптотически больших времен $t \gg t_c^1$.

В настоящем разделе мы исследуем асимптотику на временах вне пределов приближения эффективной среды, т. е. на временах $t \gg t_c$. Для пуассоновского распределения ловушек $f(l) = \exp(-cl)$ получим

$$W(t) = \iint\limits_0^\infty \tau \exp\left(-D_1k^2\tau - \frac{D_2\tau^2}{4t} - cl\right) \times \frac{\sqrt{D_2^3}}{\sqrt{\pi \ D_1t^3}}\, d\tau\, dl. \qquad (16)$$

Введем две безразмерные переменные: $x^2 = D_2\tau^2/4t$ и $y = cl$. Следовательно, получим следующую формулу, описывающую временную зависимость вероятности выживания частиц:

$$W(t) = \iint\limits_0^\infty \exp\left(-\frac{\alpha x}{y^2} - x^2 - y\right) dx\, dy. \qquad (17)$$

Здесь параметр $\alpha = 2\pi^2c^2\sqrt{D_1}/\sqrt{D_2}$. Выполнив интегрирование по переменной α, получим

$$W(t) = \frac{W(t,0)}{\sqrt{D_2c^2}} \int\limits_0^\infty \exp\left(-z^{1/3} - \frac{z^2}{\alpha^2}\right) z\, dz. \qquad (18)$$

При малых значениях параметра α методом перевала получим выражение, описывающее вероятность выживания на промежуточных временах $t_c < < t \ll t_c^1$:

$$W(t) = \frac{A}{\sqrt{t}} \exp\left(-C\left(\frac{t}{t_c}\right)^{1/6}\right). \qquad (19)$$

Здесь A — численный коэффициент, $C = (2\pi^2)^{1/3}$. Характерный размер флуктуационной области при обычной диффузии зависит от времени как $l(t) = t^{1/(d+2)}$, в случае аномальной диффузии он меняется со временем как $l(t) = t^{d_w/2(d+2)}$, что соответствует результату (19) (в показателе вместо 2 появляется индекс аномальной диффузии). Наконец, при больших значениях параметра получим асимптотическое выражение, описывающее поведение вероятности выживания диффундирующих частиц на больших временах $t \gg t_c$:

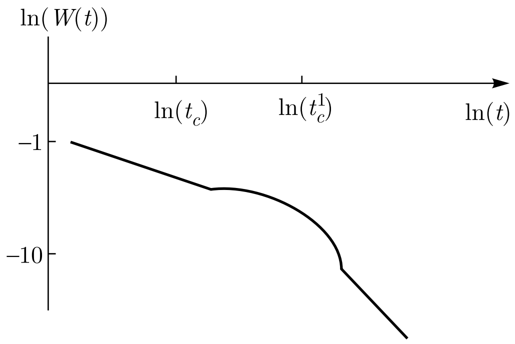
$$W(t) = B\left(\frac{t}{t_c}\right)^{3/2}. \qquad (20)$$

Здесь B — численный коэффициент.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как отмечалось выше, в задачах с аномальной диффузией возникают два диффузионных времени: первое из них обусловлено обычной диффузией на расстояние порядка между примесями, второе — аномальной диффузией на это же расстояние. Впервые установлен интервал промежуточных времен — между этими временами. На малых временах изменение числа частиц обусловлено не захватом частиц на ловушки, а несохранением числа частиц на оси гребешковой модели, т. е. уходом с оси. Этот эффект описывается выражением (15). В интервале промежуточных времен асимптотика вероятности выживания частиц носит дробно-экспоненциальный характер (19). Численный показатель выражения (19) обусловлен зависимостью среднеквадратичного смещения (7) в исследуемой модели. Наконец, на больших временах долговременная асимптотика переходит в степенную — формула (20). Необходимо отметить, что все полученные временные зависимости, описываемые формулами (15), (19) и (20) являются следствием субдиффузионного характера частиц в средах с ловушками. Они представлены на рисунке и, по-видимому, являются общими свойствами временных процессов в средах с ловушками.

Из-за медленного субдиффузионного смещения диффундирующих частиц вероятность попадания



Временные асимптотики вероятности выживания $W(t)$ на малых, промежуточных и больших временах в логарифмическом масштабе

на ловушки уменьшается, поэтому должна быть более слабая функциональная зависимость вероятности выживания от времени по сравнению с экспоненциальной зависимостью (1), как в случае обычной диффузии. Такому поведению соответствует или дробно-экспонециальная асимптотика, или степенная асимптотика. Поэтому качественно можно ожидать установленные выше временные зависимости. Однако заранее конкретный вид временной асимптотики вероятности выживания предсказать невозможно.

Полученные результаты могут быть использованы при описании диффузно-контролируемых реакций [16–19]. В частности, медленное степенное убывание вероятности выживания частиц со временем приведет к более интенсивному взаимодействию частиц и увеличению скорости течения реакции. Другая область применимости полученных результатов связана с диффузией лекарств в биологических системах замкнутого типа [20], переносом энергии в полимерных системах [21].

ПРИЛОЖЕНИЕ

Проблема захвата диффундирующих частиц в средах с ловушками

Напомним коротко известные результаты. Согласно общему подходу [1–3] строится решение стандартного уравнения диффузии

$$\frac{\partial W(t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 W(t)}{\partial t}^2 \qquad (21)$$

со следующими начальными и граничными условиями:

$$W(x,0) = \frac{1-c}{L}, \quad W(x_i,t) = W(x_{i+1},t) = 0. \qquad (22)$$

Здесь L — длина одномерной цепочки, x_i, x_{i+1} — координаты поглощающих ловушек вдоль одномерной линии. Полученное решение имеет вид

$$W(x,t) = \frac{4}{L}\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{Dk_n^2 t}{2}\right)\frac{\sin(k_n(x-x_i))}{k_n l_i}. \qquad (23)$$

Далее, полученное решение усредняется по случайному расположению поглощающих ловушек:

$$W(t) = \sum_i W_i = \sum_i \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} W(x,t)\,\partial x. \qquad (24)$$

Полученное таким образом соответствующее усредненное решение и описывает вероятность выживания частиц после захвата на поглощающие ловушки.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Овчинников, А. А. Белый, Теор. эксп. химия **2**, 405 (1966).
2. Г. В. Рязанов, ТМФ **10**, 271 (1972).
3. И. М. Лифшиц, УФН **83**, 617 (1964).
4. E. W. Montroll and G. H. Weiss, J. Math. Phys. **6**, 167 (1965).
5. J. Klafter and I. M. Sokolov, *First Steps in Random Walks*, Oxford Press Univ., Oxford (2011).
6. В. В. Учайкин, ЖЭТФ **124**, 903 (2003).
7. R. Metzler and J. Klafter, Adv. Chem. Phys. **116**, 223 (2001).
8. J. Klafter and R. Metzler, Phys. Rep. **339**, 1 (2000).
9. *Applications of Fractional Calculus in Physics*, ed. by R. Hilfer, World Sci., Singapoure (2000).
10. G. Weiss and S. Havlin, Physica A **134**, 810 (1986).
11. В. Е. Архинчеев, Э. М. Баскин, ЖЭТФ **97**, 810 (1991).
12. V. E. Arkhincheev, Physica A **307**, 131 (2002).
13. V. E. Arkhincheev, Chaos **17**, 043102 (2007).
14. В. Е. Архинчеев, ЖЭТФ **158**, 309 (2020).
15. Я. Б. Зельдович, А. Д. Мышкис, *Элементы математической физики*, Наука, Москва (1973).

16. F. Benitez, C. Duclut, H. Chate et al., Phys. Rev. Lett. **117**, 100601 (2016).

17. Sang Bub Lee, In Chan Kim, C. A. Miller, and S. Torquato, Phys. Rev. B **39**, 11833 (1989).

18. G. J. Lapeyre and M. Dentz, Phys. Chem. Chem. Phys. **19**, 29 (2017).

19. V. E. Arkhincheev, Scientific Reports, Nature Publ. Group **9**, 15269 (2019).

20. V. Mendez, A. Iomin, D. Campos, and W. Horsthemke, Phys. Rev. E **92**, 062112 (2015).

21. A. M. Berezhkovskii, L. Dagdug, and S. M. Bezrukov, J. Chem. Phys. **142**, 134101 (2015).